Statistische Physik
Übungsblatt 3

Vorlesung: Prof. Dr. Otfried Gühne
Übungen: Sönke Niekamp, Dr. Matthias Kleinmann, Do 8–10, Raum: D120

Abgabe: Di, 3. Mai 2011

1. **Operatorvariation und -ableitung** (4 Punkte)

   (a) Beschreiben Sie alle hermiteschen Matrizen A mit $\delta\,\mathrm{tr}(A^3 - 3A) = 0$.

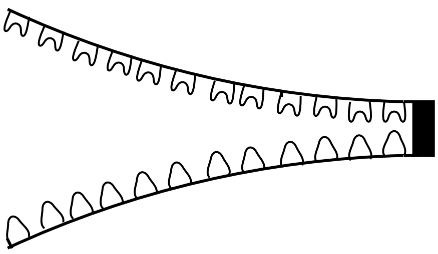
   (b) Finden Sie eine nichthermitesche Matrix, für welche $\delta\,\mathrm{tr}(AA^\dagger A - 3A) = 0$.
   Hinweis: Für $i \neq j$ gilt z.B. $(\sigma_i + i\,\sigma_j)^2 = 0$.

   (c) Bestimmen Sie X in der Reihenentwicklung

   $$\exp[\sigma_x + \varepsilon\sigma_z] = \exp[\sigma_x] + \varepsilon\, X + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

   wobei σ_x und σ_z Paulimatrizen sind.

2. **Reißverschluss** (4 Punkte)

   Wir betrachten zwei Kettenmoleküle A und B jeweils mit reaktiven Gruppen $k = 0, \ldots, N$. Die Moleküle sind bei $k = 0$ stets verbunden, so dass jeweils nur N Gruppen frei sind. Die beiden Ketten verschließen sich wie ein Reißverschluss, d.h. die Gruppen k aus beiden Molekülen können sich nur verbinden, falls bereits alle Gruppen $\ell < k$ verbunden sind. Die Bindungsenergie zwischen der k-ten Gruppe des Moleküls A und der k-ten Gruppe des Moleküls B betrage ε.
   Hinweis: Stellen Sie zunächst den Hamiltonoperator auf – die Quantenzustände für g und j offene Verbindungen erfüllen $\langle g|j\rangle = \delta_{gj}$.

   (a) Berechnen Sie die mittlere Anzahl $\langle G\rangle$ der offenen Verbindungen als Funktion der Temperatur sowie als Funktion der Variablen $x \equiv \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}$.

   (b) Betrachten Sie $\langle G\rangle$ für den Fall hoher und tiefer Temperatur.

   (c) Betrachten Sie $\langle G\rangle$ und $\langle G\rangle/N$ für sehr lange Ketten.

   (d) Betrachten Sie $\langle G\rangle$ für festes T und verschwindenden Bindungsenergie, wobei (i) N fest oder (ii) εN fest.

3. **Ortho- und Parawasserstoff***
   Die Kernspins im Wasserstoffmolekül H_2 können parallel oder antiparallel ausgerichtet sein. Analog zum Ortho- und Parahelium tritt also eine Kopplung von Kernspin und -bahn und eine dementsprechende Triplett- bzw. Singulettstruktur auf. Nehmen Sie nun an, dass die Ortho- und Parakomponenten im Gleichgewicht stehen, und betrachten Sie lediglich die Rotationsenergie der beiden Kerne, d.h. der Hamiltonoperator ist $H = \vec{L}^2/2J$ mit dem Bahndrehimpuls $\vec{L}$ und Trägheitsmoment J.

   (a) Wie lauten die Triplett- und Singulettzustände? Sind sie symmetrisch oder antisymmetrisch?

   (b) Für welche Eigenwerte von $\vec{L}^2$ ist die Ortswellenfunktion symmetrisch bzw. antisymmetrisch?

   (c) Die beiden H-Kerne sind Fermionen, das hat Auswirkungen auf die möglichen Energieeigenwerte von Ortho- und Parawasserstoff. Welche?

   (d) Berechnen Sie die innere Energie U und Wärmekapazität $C = \partial U/\partial T$ für jede der Komponenten sowie deren Gemisch.

   (e) Wie verhält sich die innere Energie und Wärmekapazität für niedrige bzw. hohe Temperaturen?